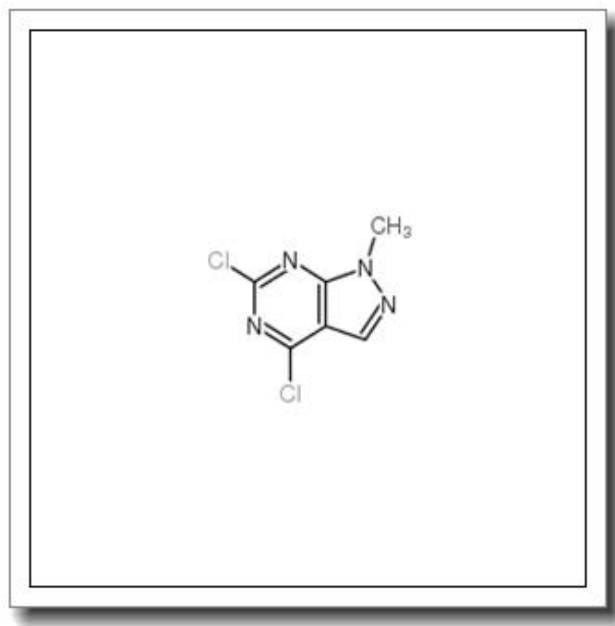


4,6-二氯-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶

4,6-dichloro-1-methylpyrazolo[3,4-d]pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	4,6-dichloro-1-methylpyrazolo[3,4-d]pyrimidine
中文名称	4,6-二氯-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶
CAS 号	98141-42-5
分子式	C ₆ H ₄ Cl ₂ N ₄
分子量	203.029
纯度	≥ 96%

产品说明

4,6-二氯-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4,6-dichloro-1-methylpyrazolo[3,4-d]pyrimidine，是一种杂环有机化合物，CAS 号为 98141-42-5。其分子式为 C₆H₄Cl₂N₄，分子量为 203.029，纯度≥96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末，具有吡唑并嘧啶骨架结构，两个氯原子位于嘧啶环的 4 位和 6 位，甲基取代基位于吡唑环的 1 位。其结构特性使其在亲核取代反应中表现出较高活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类衍生物，该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体。其吡唑并嘧啶骨架可干扰核酸代谢，在药物化学中常用于构建激酶抑制剂的核心结构。氯原子的存在为后续功能化修饰提供了重要位点，使其在抗癌、抗病毒等药物研发中具有显著价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域，具体包括：作为蛋白激酶抑制剂的合成前体，用于肿瘤靶向治疗药物的开发；在抗病毒药物设计中作为核苷类似物的修饰基团；此外，还可用于材料科学中功能性分子的构建。实验室研究中常用于探索构效关系及优化先导化合物活性。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO），微溶于甲醇，水溶性较差，配制溶液时建议预溶于有机溶剂再稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%，批次间质量稳定。MS 和 NMR 谱图验证结构准确性。安全数据表明该化合物具有刺激性，接触皮肤可能引起过敏反应。操作时应避

免吸入粉尘，如意外接触需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，建议通过专业机构进行无害化处理。

注：本说明书中技术参数基于当前测试条件，实际应用前建议进行小试验证。具体安全操作请参照最新版 MSDS 文件执行。